

# Enlace Covalente: Contenidos

ción

e Lewis. Regla del Octeto

para la formulación de estructuras de Lewis.

al sobre un átomo.

e resonancia.

s a la regla del octeto.

ía molecular (RPECV)

y Polaridad molecular.

el Enlace de Valencia (TEV)

Fundamentales.

a moléculas sencillas.

de Orbitales Atómicos.

léculas poliatómicas con enlace sencillo.

léculas con enlaces dobles y triples.

# El Enlace de Orbitales Moleculares (TOM)

Fundamentales: **C**ombinación **L**ineal de **O**rbitales **A**tómicos: **CLOA**

atómicas sencillas homonucleares:

enlazantes y antienlazantes.

$\sigma$  y  $\pi$

Orden electrónica molecular: reglas para su construcción.

Orden electrónica molecular y diagrama de OM

moléculas diatómicas sencillas heteronucleares

moléculas poliatómicas: OM no enlazantes

# Introducción

formación de moléculas es conocida desde el principio de la Química.

Los enlaces son el “*pegamento*” que mantiene unido los átomos

¿Átomos que difícilmente forman enlaces y otros que forman enlaces fuertes?

¿Por qué algunos átomos no forman enlace se denominó **valencia**, pero este concepto era/es bastante **oscuro**

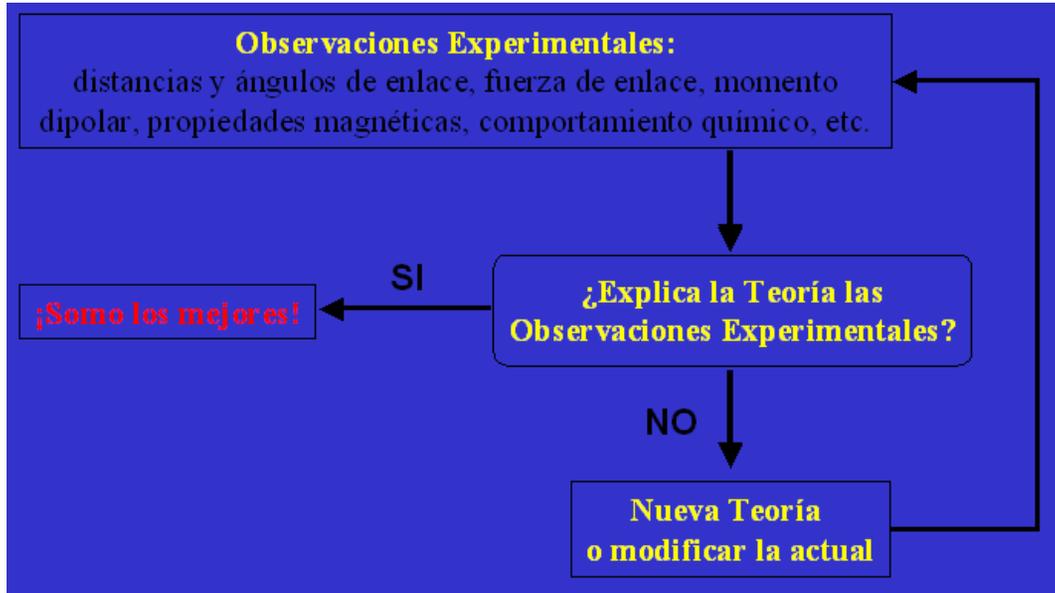
Después de la **Mecánica Cuántica** se desarrollaron varias **Teorías de Enlace**;  
sólo alguna tiene cierta utilidad

**Lewis** fue el primero que se dio cuenta de que:

lo que interviene son los **electrones más externos** (electrones de valencia)  
(los átomos del mismo grupo tienen propiedades químicas similares)

En un enlace **covalente** hay **compartición de electrones** entre los átomos enlazados

## Aplicación de cualquier Teoría de Enlace



Lo más importantes son las **distancias de enlace:**  
están **relacionadas con la fuerza del enlace**

(para átomos iguales)

Distancia de enlace (Å)

1.43

**distancia más corta implica**

1.21

**enlace más fuerte**

1.54

**igual distancia implica**

1.33

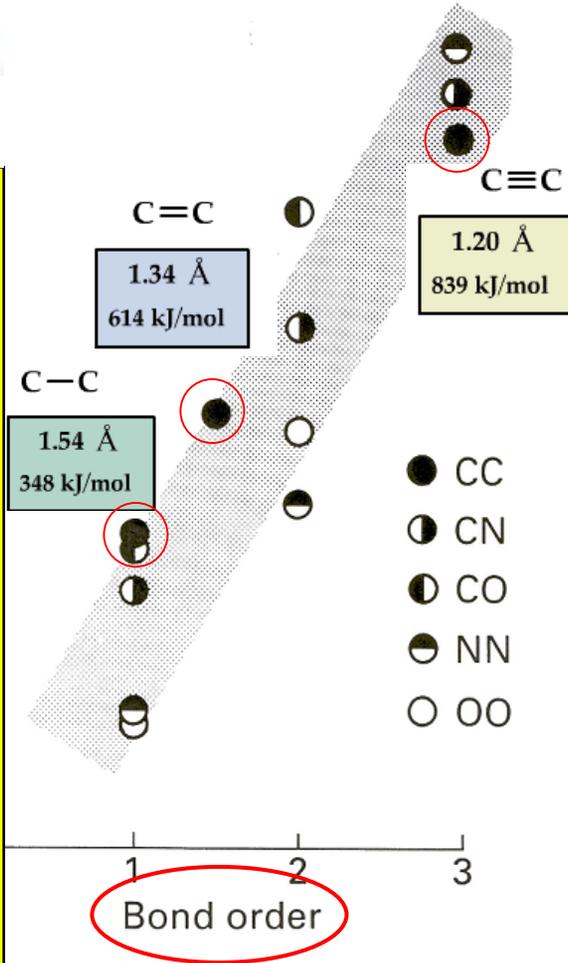
**igual fuerza de enlace**

1.20

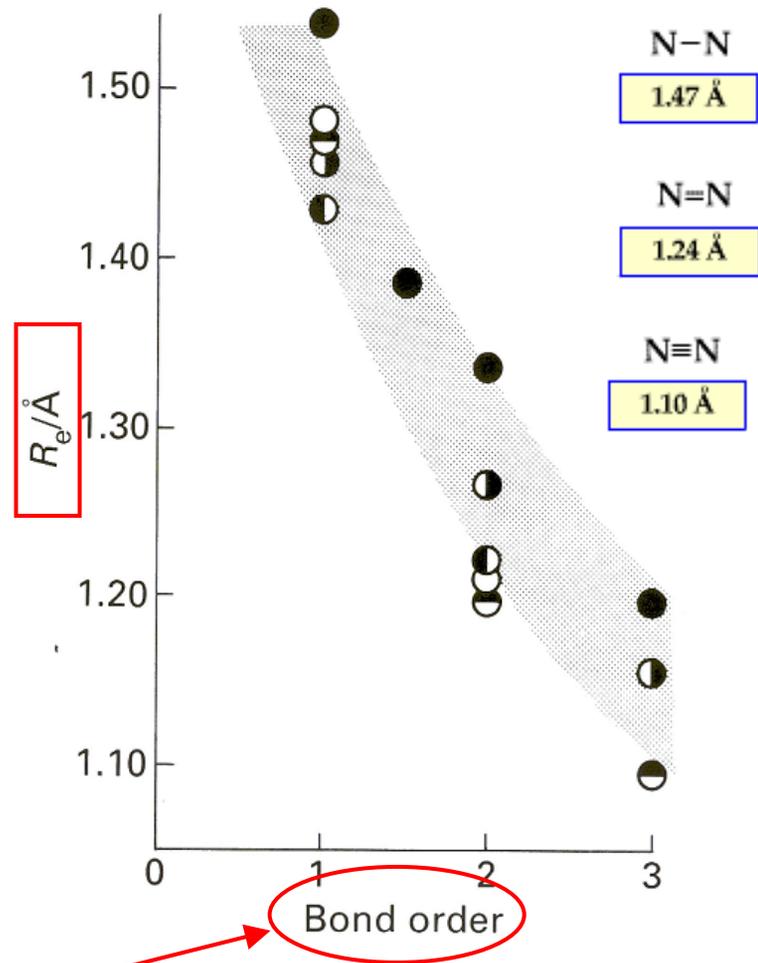
Ej: O<sub>3</sub> enlaces O-O iguales

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

## Energía de enlace vs orden de enlace



## Distancia de enlace vs orden de enlace



**orden de enlace:** medida cualitativa de la fuerza del enlace

# Teoría de Lewis.

Los **electrones de valencia** desempeñan un papel fundamental en el **enlace químico**.

La **transferencia de electrones** conduce a los **enlaces iónicos**.

La **compartición de electrones** lleva a los **enlaces covalentes**.

Los electrones se transfieren o se comparten de manera que **los átomos adquieren una configuración de gas noble**:

**El octeto.**

El **enlace químico** se establece entre **dos átomos** de una **molécula** que **comparten un par de electrones**.

El **átomo** diferente del hidrógeno tiende a formar **enlaces covalentes** que rodea de **ocho electrones** de valencia.

## Símbolos de Lewis



Un **símbolo químico** representa el **núcleo** y los **electrones internos** de un **átomo**.

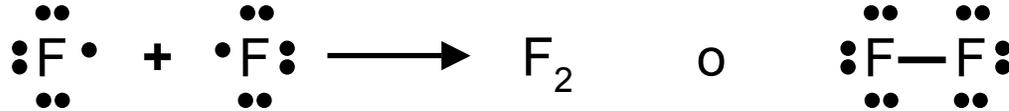
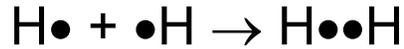
Los **puntos** situados alrededor del símbolo representan a los **electrones de valencia** o **electrones más externos**.

Distintos Grupos T.P.

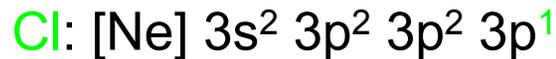
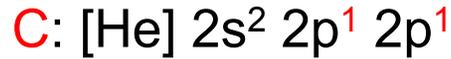


Mismo Grupo T.P.

ejemplos:

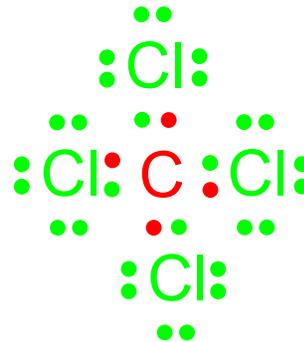
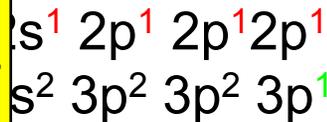


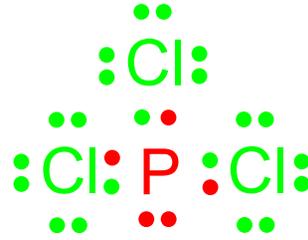
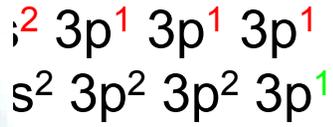
Considerando



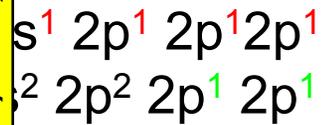
NO se cumple la regla del octeto

o bien se podría considerar la posibilidad de desaparecer electrones en el átomo de C (estado excitado)

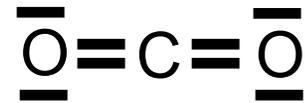




Hemos comparten **dos o más pares de electrones**  
 se forman **enlaces múltiples**



o

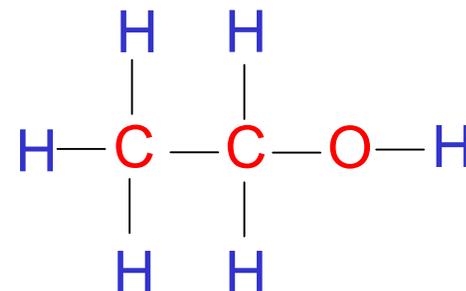


## estrategia para la formulación de estructuras de Lewis

La estructura básica del compuesto se define colocando los átomos en el espacio unidos por enlaces sencillos.

Se define el **ESQUELETO** de la molécula:

Se debe distinguir entre los átomos **centrales** y los **terminales**.



Se debe distinguir el **número total de electrones de valencia** disponibles del número de electrones de valencia de cada átomo.

Se restará un electrón por cada unidad de carga positiva y se sumará un electrón por cada unidad de carga negativa.

Se debe asignar **dos electrones por cada enlace** entre un átomo central y cada átomo que lo rodean en el esqueleto de la molécula.

Se debe verificar **los octetos** de los átomos.

Los electrones que no participan en enlaces se representan como **pares libres**.

En algunos casos es necesario establecer **enlaces múltiples** entre átomos que se rodean utilizando **pares no enlazantes** de éstos últimos.

ones adicionales:

centrales suelen ser los de menor electronegatividad.

de C son casi siempre átomos centrales.

de H son siempre átomos terminales.

electrones de valencia de los átomos de una estructura de Lewis  
ser en ella.

te, todos los electrones están apareados.

te, cada átomo requiere un octeto: H sólo requiere 2 electrones.

C, N, O, P y S son los que más fácilmente forman enlaces  
útiles.

ras suelen ser compactas y simétricas.

Ejemplos:

1) Esqueleto



de electrones de valencia

|                            |                |                          |                                       |
|----------------------------|----------------|--------------------------|---------------------------------------|
| $2 \text{p}^4 \rightarrow$ | $6 \text{e}^-$ | $1 \text{S} \rightarrow$ | $6 \text{e}^-$                        |
| $2 \text{p}^4 \rightarrow$ | $6 \text{e}^-$ | $2 \text{O} \rightarrow$ | $\frac{12 \text{e}^-}{18 \text{e}^-}$ |

de enlaces covalentes

tiende a completar su octeto:

Octetos =  $2\text{e}^- \times n^\circ$  de átomos de H +  $8\text{e}^- \times n^\circ$  de átomos restantes

$$2\text{e}^- \times 0 + 8\text{e}^- \times 3 = 24 \text{e}^-$$

Enlaces (compartidos) =  $n^\circ$  de  $\text{e}^-$  octetos -  $n^\circ$  de  $\text{e}^-$  de valencia

$$24 \text{e}^- - 18 \text{e}^- = 6 \text{e}^-$$

=  $n^\circ e^- \text{ enlace} / 2$  (cada enlace se forma con un par de  $e^-$ )

$2:$   $6/2 = 3 \text{ enlaces}$



e electrones sin compartir

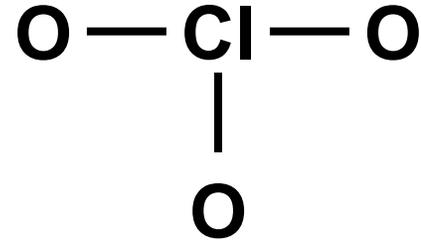
partir =  $n^\circ$  de  $e^-$  de valencia –  $n^\circ$  de  $e^-$  de enlace

$2:$   $18e^- - 6e^- = 12 e^-$  (seis pares)



orato)

### 1) Esqueleto



o de electrones de valencia

$$1 \times 7e^- + 3 \times 6e^- + 1 e^- = 26 e^-$$

o de enlaces covalentes

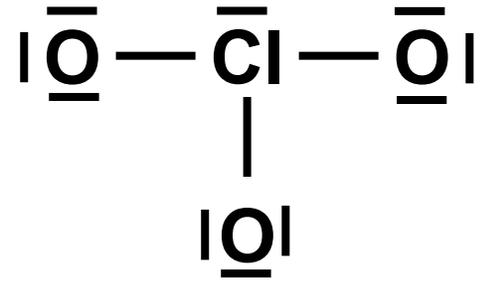
de octeto =  $2 e^- \times 0 + 8 e^- \times 4 = 32 e^-$   
*s para satisfacer todos los octetos)*

e electrones de enlace =  $32 e^- - 26 e^- = 6e^-$  (*compartidos*)

e enlaces =  $6e^- / 2 = 3$  enlaces

o de electrones sin compartir

=  $20 e^-$  (*10 pares*)



¿Dónde está la carga negativa?

onio)

## 1) Esqueleto



o) de electrones de valencia

$$1 \times 5e^- + 1 \times 6e^- - 1 e^- = 10 e^-$$

o) de enlaces covalentes

de octeto =  $2 e^- \times 0 + 8 e^- \times 2 = 16 e^-$   
*s para satisfacer todos los octetos)*

e electrones de enlace =  $16 e^- - 10 e^- = 6e^-$  (*compartidos*)

e enlaces =  $6e^- / 2 = 3$  enlaces

o) de electrones sin compartir



e- =  $4 e^-$  (*2 pares*)

¿Dónde está la carga positiva?

## Carga formal sobre un átomo

**La carga formal** sobre un átomo se define como la **diferencia** entre el **número de electrones de valencia** del átomo libre y el **número de electrones asignados** a ese átomo en la estructura de Lewis.

**Carga formal** =  $n^\circ e^-$  valencia átomo libre -

$n^\circ$  total  $e^-$  no compartidos -  $\frac{1}{2}$  ( $n^\circ e^-$  enlace)

Las **cargas formales** se utilizan para **elegir la estructura** de Lewis **correcta** para un determinado compuesto químico:

**Reglas generales:**  
**Regla 1:** Se prefiere aquella estructura de Lewis para la cual las **cargas formales** sobre todos los átomos sean **nulas**.

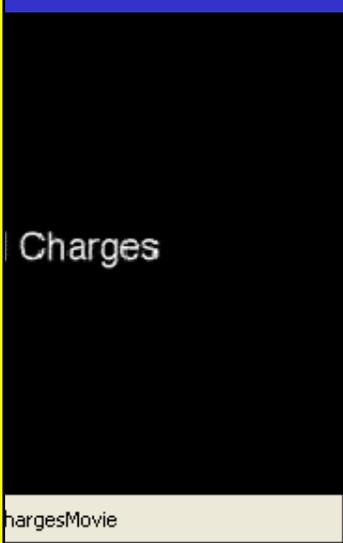
**Regla 2:** La **carga formal** es igual a la **carga neta** de la especie.

**Regla 3:** La **carga formal** del mismo signo en átomos adyacentes es poco probable.

**Regla 4:** Las **estructuras de Lewis** con **cargas formales altas** (+2, +3, -2, -3, etc...) son **menos probables** que aquellas con **cargas formales pequeñas**.

**Regla 5:** Entre **distribuciones similares** de **cargas**, la **estructura de Lewis** más probable es la en la cual las **cargas negativas** están sobre los **átomos más electronegativos**.

lorato)

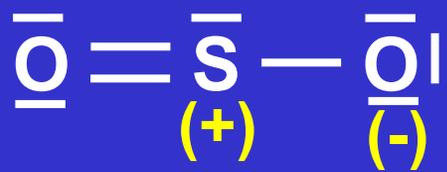


sonio)

$$6 - 2 - 6/2 = +1$$

$$-4 - 4/2 = 0$$

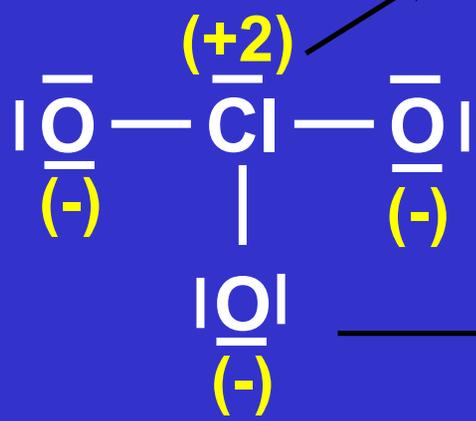
$$6 - 6 - 2/2 = -1$$



$$7 - 2 - 6/2 = +2$$

$$6 - 6 - 2/2 = -1$$

$$6 - 6 - 2/2 = -1$$



$$6 - 6 - 2/2 = -1$$

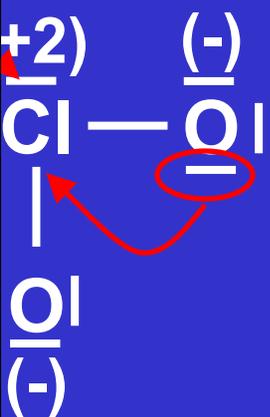
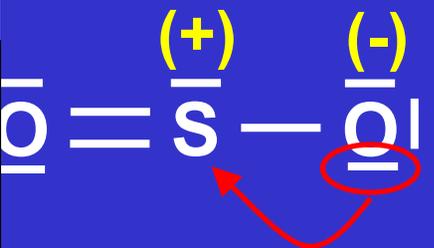
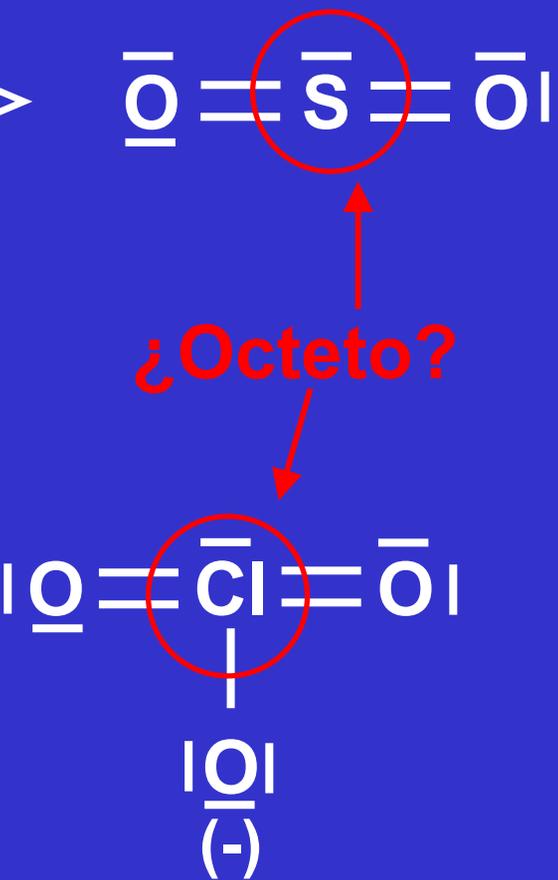
$$5 - 2 - 6/2 = 0$$



$$6 - 2 - 6/2 = +1$$

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVIA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

En algunos casos se pueden **eliminar cargas formales** de distinto signo en átomos adyacentes por **formación de enlaces adicionales**; el átomo con carga negativa aporta los dos electrones de enlace: **ENLACE DATIVO**



Cartagena99

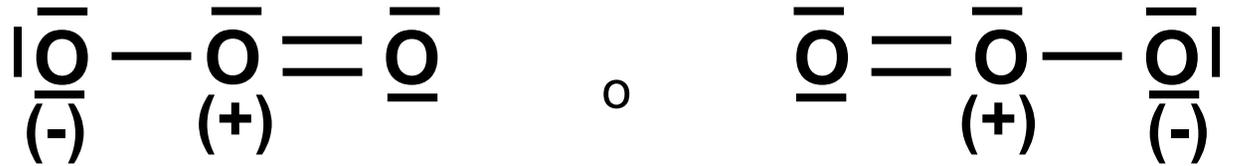
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

## Concepto de resonancia

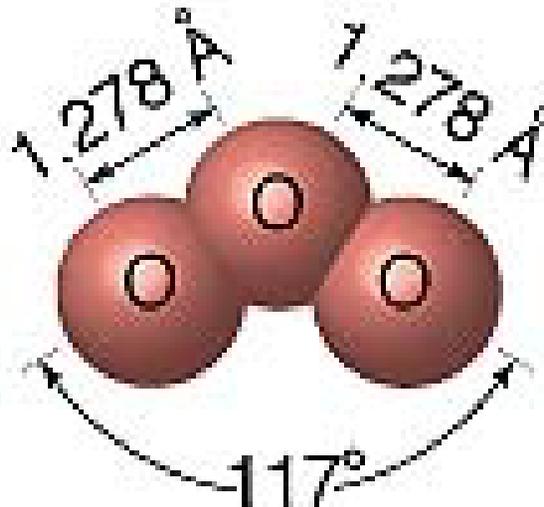
En algunos casos es posible dibujar **dos o más estructuras** de Lewis y **no es posible elegir** una u otra en función de los valores de las energías de enlace.

¿ Posibles estructuras ?



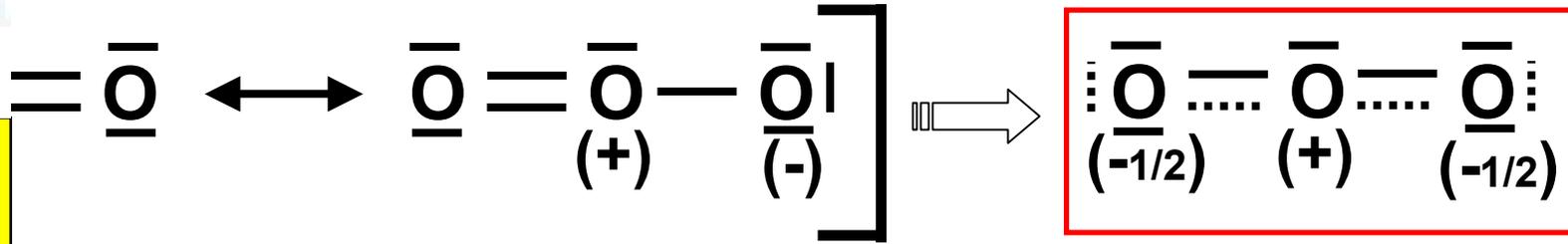
En la molécula de  $O_3$  las dos distancias O-O son iguales:

ninguna de las estructuras representa la realidad

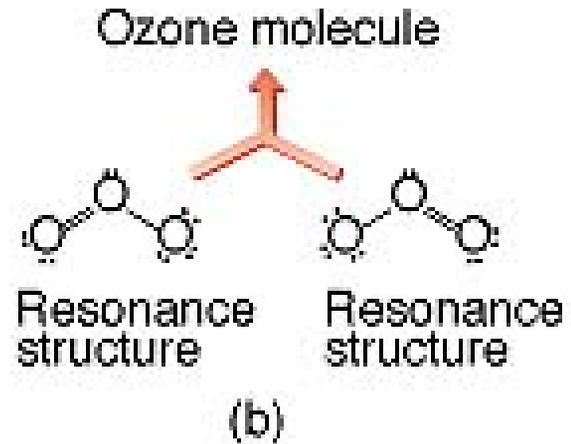
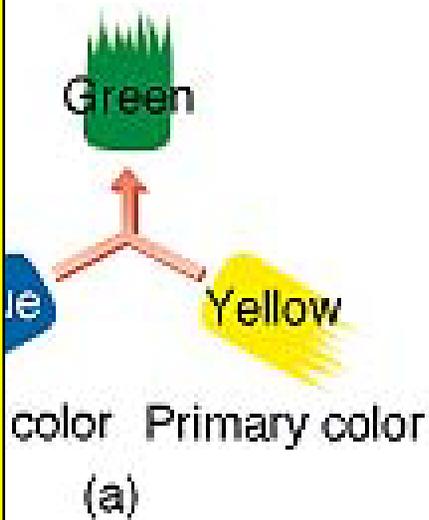


es una **situación intermedia**

de las dos (o más) formas resonantes.



... o **formas resonantes** del O<sub>3</sub>



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

onato) (todas las distancias C-O son iguales)

$$\text{valencia} = 1 \times 4e^- + 3 \times 6e^- + 2 e^- = 24 e^-$$

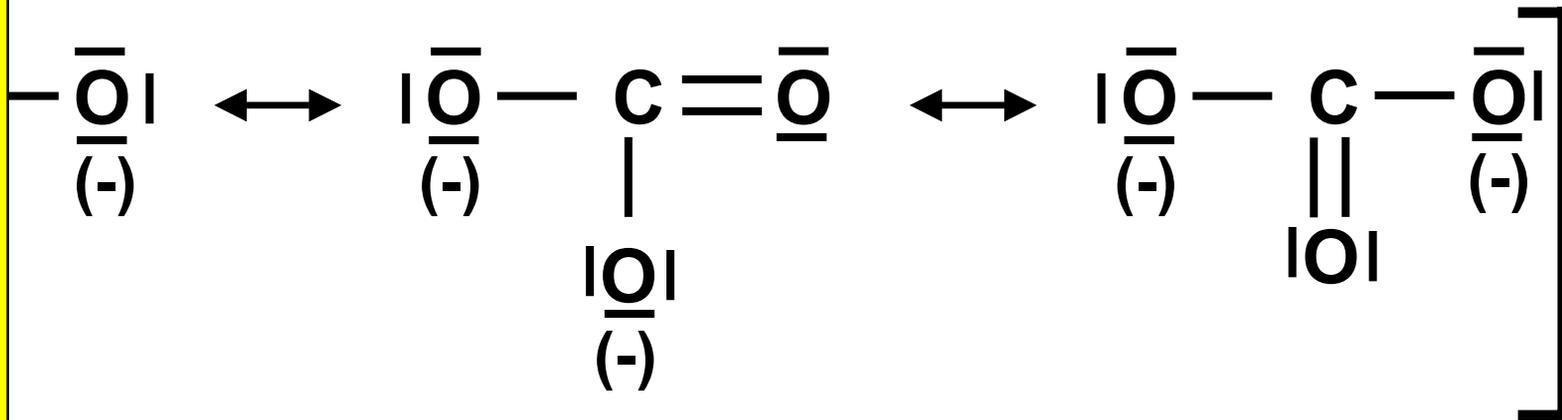
$$\text{octeto} = 4 \times 8e^- = 32 e^-$$

$$\text{enlace} = 32 e^- - 24 e^- = 8 e^- \quad \Rightarrow$$

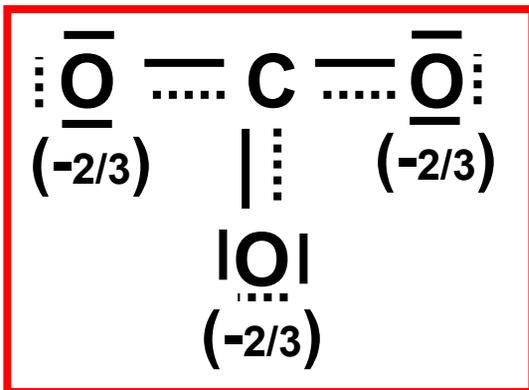
4 enlaces

$$\text{compartir} = 24 e^- - 8e^- = 16 e^- \quad \Rightarrow$$

8 pares



Estructuras o **formas resonantes** del *carbonato*



Orden de enlace C-O: **4/3**  
(Intermedio entre sencillo y doble)

## Excepciones a la regla del octeto

Tipos de excepciones a la regla del octeto:

o incompleto.

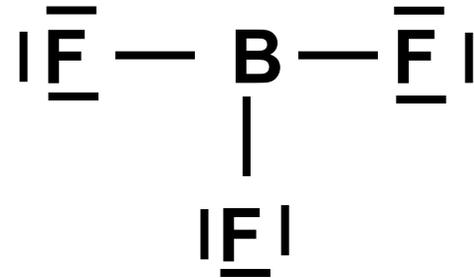
Numero de electrones que rodean al átomo central en una molécula es menor que ocho (8); para átomos **Be, B y Al**



(dos enlaces)



(tres enlaces)



Moléculas con número impar de electrones.

Algunas moléculas pueden cumplir la regla del octeto: 8 y 2 son números pares.

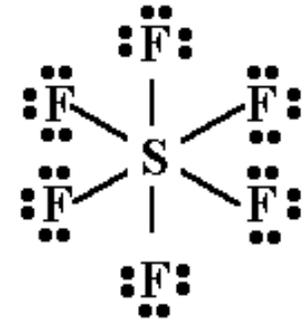
Electrones de valencia:  $1 \times 5e^- + 1 \times 6e^- = 11 e^-$



**expandido.**

En algunos compuestos hay **más de 8 electrones de valencia alrededor del mismo átomo: Octeto Expandido** (hasta un máximo de 12).

Esto ocurre principalmente en átomos de **elementos del 3º período en adelante (Z>20):** los orbitales s y p **tienen orbitales d** para formar enlaces.



**El tamaño del octeto expandido:**

**$6 \text{ e}^- \text{ valencia} + 1 \text{ e}^- \text{ por enlace} + \text{e}^- \text{ carga}$**



**$= 7 \text{ e}^- \text{ valencia} + 2 \times 1 \text{ e}^- \text{ de enlace} + 1 \text{ e}^- \text{ carga} = 10 \text{ electrones}$**

# Logros y limitaciones de la Teoría de Lewis

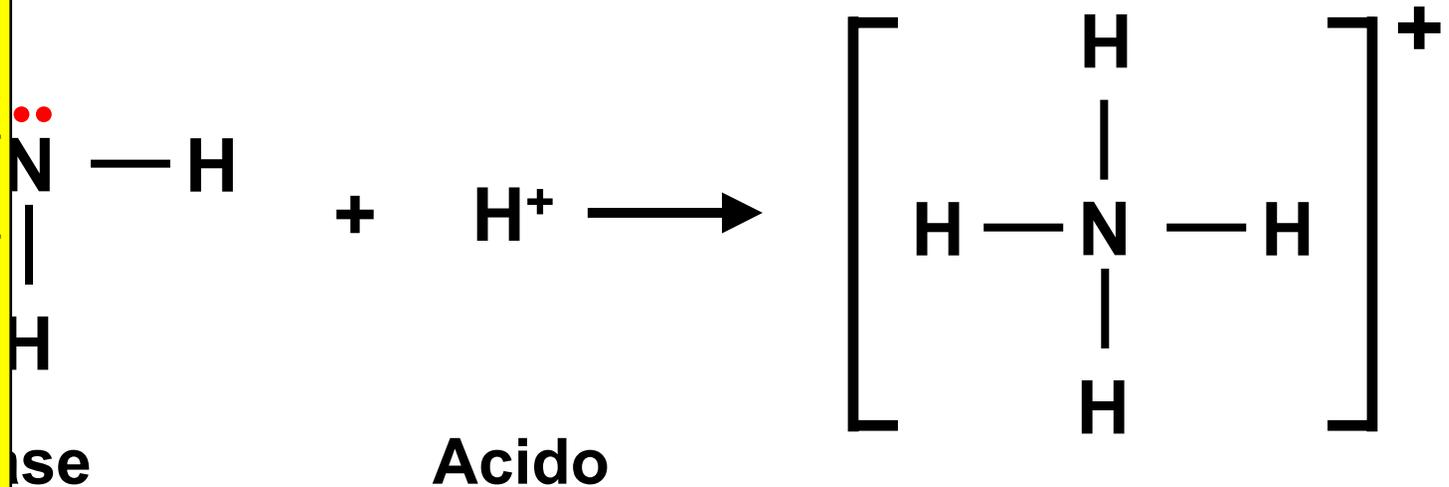
teoría sencilla e intuitiva que unida a la RPECV permite enlace y predecir la geometría de muchas moléculas

s.

hacer una generalización del concepto de ácidos y bases:

con uno o más pares solitarios serán bases

en las que algún átomo central con octeto incompleto son



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



## iones

funciona **bien** para los **20 primeros elementos**.

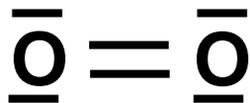
Incluso para éstos hay moléculas (NO) con **número impar** de electrones en las que no se cumple la regla del octeto.

Para **átomos** más **pesados** es muy común que **no** se cumpla la **regla del octeto** (octeto expandido).

**Simplificación** de la realidad: los electrones no están fijos; son muy complejos de movimiento.

**Casos muy importantes** en los que la teoría **no sirve**, incluso si se cuenta todas las modificaciones posteriores (incluida la que es una modificación de origen mecanocuántico):

$C_2$  debería tener **enlace cuadruple**. Pero **no** lo tiene:



El enlace en  $N_2$  y  $O_2$  es muy fuerte, pero en el ión  $O_2^+$  es **más fuerte** que en  $O_2$  y más débil que en  $N_2^+$  que en  $N_2$

## ¿Por qué?

La existencia de la molécula ión  $H_2^+$  se explica por tierra la hipótesis fundamental de la teoría según la cual el enlace entre átomos se hace por **pares de electrones compartidos**

(aquí sólo hay **un electrón**)